Index

Pagina

Commentationes

ALI, M. A.: see DASGUPTA, N. K. 101
APPEL, K.: see LADIK, J. 132
ARMSTRONG, D. R., and P. G. PERKINS: Calculation of the π-Electronic Structures of Vinyl Boron Compounds by the Free-Electron Method 69
— —: Self Consistent Molecular Orbital Calculations on Organoboron Compounds. Part I. Halogenovinylboranes 352
AVOIRD, A. VAN DER, and P. ROS: Transition Probabilities in the $CuCl_4^{2-}$-Complex . . . 13

BASCH, H., and H. B. GRAY: Approximate Analytical Orbital Functions for Second and Third-Row Transition Metals 367
BERTHIER, G.: see VEILLARD, A. 347
BROWN, W. B.: see CHANG, T. Y. 393

CAMBRON-BRÜDERLEIN, H., and C. SANDORFY: A Hückel Molecular Orbital Approach to Stereochemical Problems based on the Variation of the Coulomb Integral 224
CAMPADELLI, F., and C. ZAULI: Atomic Potentials from SCF Data 260
CHANG, T. Y., and W. B. BROWN: A Perturbation Theory of Isoelectronic Molecules: Application to CO Based on N_2 393
CHRISTOFFERSEN, R. E., and G. G. HALL: Relativistic Effects in Aromatic Molecules. Orbit-Orbit Coupling in the Presence of a Magnetic Field. Evaluation of Integrals Involving the Interelectronic Coordinate 250
CLOSSON, W. D.: see HALPER, J., and H. B. GRAY 174

DASGUPTA, N. K., and M. A. ALI: S.C.F.M.O. Study of Hafner's Hydrocarbons. . . . 101
DESCHAMPS, J.: voir LEIBOVICI, C. 321
DUIJNEVELDT, F. B. VAN, V. M. S. GIL, and J. N. MURRELL: The Calculation of Directly Bonded ^{13}C–H and ^{13}C–^{13}C Coupling Constants using Delocalized Molecular Orbital Theory 85

ELLISON, F. O.: see WU, A. A. 460
EMPEDOCLES, P. B., and J. W. LINNETT: Ground State Wavefunctions of some Conjugated Carbon Compounds — NPSO Method 377
— —: Lower Excited State Wavefunctions for some Conjugated Carbon Compounds — NPSO Method 390

FISCHER-HJALMARS, I.: Connections between Current π-Electron Theories 332
FORSTER, L. S.: see NISHIMOTO, K. 155
FRENKEL, E.: s. HANSEN, K. H. 123

GIL, V. M. S.: see DUIJNEVELDT, F. B. VAN, and J. N. MURRELL 85
—: see MURRELL, J. N. 114
GLIEMANN, G.: s. STEINBORN, E. O. 185
GOLDSTEIN, J. H.: see WATTS, V. S. 265
GOODISMAN, J.: On the Calculation of Energies of Excited States 343
GOUTERMAN, M.: see ZERNER, M. 44
GRAY, H. B.: see HALPER, J., and W. D. CLOSSON 174
—: see BASCH, H. 367

HALL, G. G.: see CHRISTOFFERSEN, R. E. 250
HALPER, J., W. D. CLOSSON, and H. B. GRAY: Electronic Structures and Spectra of Cyanoethylene Derivatives 174
HANSEN, K. H., u. E. FRENKEL: Ein Zentralmodell zur Perimetermoleküle 123
HEILBRONNER, E.: The Electronic Spectra of [n]-Radialenes 64
HUSH, N. S.: Ground-State Energies of Mono-, Di-, Tri- and Tetranegative Ions of Porphins and their Metal Complexes 108

Pagina

Ishitani, A., and S. Nagakura: The Electronic Spectra of the Anion Radicals of Substituted Benzenes 236

Jungen, M., H. Labhart und G. Wagnière: Pariser-Parr-Pople-Rechnungen mit σ- und π-Basisorbitalen 305

Katagiri, S., and C. Sandorfy: Pariser and Parr Type Calculations on Saturated Hydrocarbons I 203
Kettle, S. F. A.: A Topological Equivalent-Orbital Approach to the Bonding in some Tetrahedral Molecules 150
Klasinc, L.: see Maksić, Z., and M. Randić 273
Kutzelnigg, W.: Zur Behandlung der Bindungsalternierung als Störung in der Hückelschen MO-Theorie 417

Labhart, H.: s. Jungen, M., u. G. Wagnière 305
Ladik, J., and K. Appel: Pariser-Parr-Pople Calculations on Different DNA Constituents 132
Leibovici, C., et J. Deschamps: Etude des spectres électroniques de quelques p. quinones polycycliques par la méthode de Pariser-Parr-Pople 321
Linnett, J. W.: see Empedocles, P. B. 377
—: see Empedocles, P. B. 390

Malrieu, J. P.: Etude semiempirique de la configuration moléculaire stable des molécules ionisées ou excitées 434
Maksić, Z., L. Klasinc, and M. Randić: Maximum Overlap Hybridization in Cyclobutane, Bicyclobutane and Related Highly Strained Systems 273
—: see Randić, M. 145
Menna, E., R. Moccia, and L. Randaccio: Theoretical Calculation of the Vibrational Spectra of Some XH_n Type Molecules 408
Moccia, R.: see Menna, E., and L. Randaccio 408
Murrell, J. N.: see Duijneveldt, F. B. van, and V. M. S. Gil 85
—, and V. M. S. Gil: The Relative Importance of Delocalization Terms in Proton Spin-Spin Coupling Constants 114

Nagakura, S.: see Ishitani, A. 236
Nishimoto, K., and L. S. Forster: SCFMO Calculations of Heteroatomic Systems with the Variable β Approximation. I. Heteroatomic Molecules Containing Nitrogen or Oxygen Atoms 155

Paldus, J.: see Polák, R. 37
Perkins, P. G.: see Armstrong, D. R. 69
—: see Armstrong, D. R. 352
Polák, R., and J. Paldus: Generalized Hückel Treatment of a Simple Model of Transannular Interaction and Excimer Formation 37

Randaccio, L.: see Menna, E., and R. Moccia 408
Randić, M., and Z. Maksić: Ligand Field Splitting in Seven Coordinated NbF_7^{2-}-Type Complexes 145
—: see Maksić, Z., and L. Klasinc 273
Ros, P., and G. C. A. Schuit: Molecular Orbital Calculations on Copper Chloride Complexes 1
—: see Avoird, A. van der 13
Rossi, M.: Two By Two Rotations of Orbitals for Minimizing the Energy of LCAO–MO Wave Functions 30
Ruch, E., u. I. Ugi: Das stereochemische Strukturmodell, ein mathematisches Modell zur gruppentheoretischen Behandlung der dynamischen Stereochemie 287

Sandorfy, C.: see Katagiri, S. 203
—: see Cambron-Brüderlein, H. 224
Schäffer, C. E.: A Ligand Field Approach to Orthoaxial Complexes. Perturbation Treatment using Zero-order Functions with Octahedral Basis 166
Schuit, G. C. A.: see Ros, P. 1
Smeyers, Y. G.: About Evaluation of Many-Center Molecular Integrals 452
Steinborn, E. O., u. G. Gliemann: Zur Deutung der Ultraviolett-Absorptionsspektren der Alkalihalogenid-Kristalle 185

Pagina

UGI, I.: s. RUCH, E. 287

VEILLARD, A.: Two-Configuration, Self-Consistent Field Theory 22
—, and G. BERTHIER: π-Electron Approximation in Pyridine and Related Compounds 347

WAGNIÈRE, G.: s. JUNGEN, M., u. H. LABHART 305
WATTS, V. S., and J. H. GOLDSTEIN: A Maximum Overlap Orbital Calculation of ^{13}C–H Coupling Constants in the Vinyl Halides 265
WITKOWSKI, A.: Exciton-Exciton Interaction Resulting from Phonon-Exciton Coupling 317
WU, A. A., and F. O. ELLISON: A Scaled United Atom Model for Diatomic Hydrides . . 460

ZAULI, C.: see CAMPADELLI, F. 260
ZERNER, M., and M. GOUTERMAN: Porphyrins. IV. Extended Hückel Calculations on Transition Metal Complexes 44

Relationes

BASU, R. (née BHATTACHARYA), and S. K. BOSE: Simple Hückel Calculation on Triphenyl Cyclopropenyl Cation 94
BOSE, S. K.: see BASU, R. 94
TYUTYULKOV, N., u. R. VODENITSCHAROV: Unter Vernachlässigung der Elektronenwechselwirkung erhaltene Molekülbahnfunktionen als Basis für ASMO–LCAO–CI-Rechnungen an ungesättigten Kohlenwasserstoffen 98
VODENITSCHAROV, R.: s. TYUTYULKOV, N. 98

Annotationes et Errata

GOUTERMAN, M.: see ZERNER, M. 202
HARCOURT, R. D.: Valency Structures for N_2O_4 202
—: Valency Structures for Oxalate and Dithionite Anions and Dimers of Nitrosoalkanes 202
ZERNER, M., and M. GOUTERMAN: Porphyrins. IV Extended Hückel Calculations on Transition Metal Complexes 202

Theoretica Chimica Acta

Die Zeitschrift erscheint im Interesse rascher Veröffentlichung nach Maßgabe des eingehenden Materials zwanglos in Heften, die zu Bänden vereinigt werden. Der Preis des Bandes beträgt DM 48,—.

Grundsätzlich dürfen nur Arbeiten eingereicht werden, die vorher weder im Inland noch im Ausland veröffentlicht worden sind. Der Autor verpflichtet sich, sie auch nachträglich nicht an anderer Stelle zu publizieren. Mit der Annahme des Manuskriptes und seiner Veröffentlichung durch den Verlag geht das Verlagsrecht für alle Sprachen und Länder einschließlich des Rechts der fotomechanischen Wiedergabe oder einer sonstigen Vervielfältigung an den Verlag über. Jedoch wird gewerblichen Unternehmen für den innerbetrieblichen Gebrauch nach Maßgabe des zwischen dem Börsenverein des Deutschen Buchhandels e. V. und dem Bundesverband der Deutschen Industrie abgeschlossenen Rahmenabkommens die Anfertigung einer fotomechanischen Vervielfältigung gestattet. Wenn für diese Zeitschrift kein Pauschalabkommen mit dem Verlag vereinbart worden ist, ist eine Wertmarke im Betrage von DM 0,30 pro Seite zu verwenden. *Der Verlag läßt diese Beträge den Autorenverbänden zufließen.*

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. in dieser Zeitschrift berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, daß solche Namen im Sinn der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

In order to avoid delay in publication, this journal is issued at indefinite intervals, according to the material received, and consists of loose numbers, for subsequent assembly in volumes. The price is DM 48.— per volume.

Special attention is drawn to the fact that sole copyright for all languages and countries is transferred to the publishers immediately the manuscript is accepted and published by them. It is a fundamental condition that no manuscript submitted shall have been or will be published elsewhere either at home or abroad.

Unless special permission has been granted by the publishers, no photographic reproductions, microfilms, microphotos or other reproductions of a similar nature may be made of the journals, of individual contributions contained therein or of extracts therefrom.

The reproduction of registered names, trade marks, etc. in this journal, even if not specially indicated, does not warrant the assumption that such names, as defined by the laws affecting protection of trade marks, etc., may be regarded as uncontrolled and therefore for the free use of everybody.

Afin d'assurer la publication la plus rapide possible, la revue paraît à intervalles non réguliers, dans la mesure des articles reçus, sous forme de fascicules séparés qui seront reliés en volumes. Le prix de chaque volume est de 48 DM.

L'attention est tout particulièrement attirée sur le fait qu'une fois le manuscrit accepté et publié par les éditeurs, l'unique copyright pour tous pays et toutes langues leur est réservé. Ne doivent être en principe envoyés que les ouvrages qui n'ont jamais été et ne seront jamais publiés ni dans le pays même de l'auteur ni à l'étranger.

En outre, il n'est pas permis sans l'autorisation expresse des éditeurs de faire des reproductions photographiques, des microfilms, des microphotos, etc. . . ., des revues publiées, des communications individuelles ou d'extraits de ces dernières.

La reproduction dans cette revue de marques déposées, marques de fabrique, désignations de marchandises, etc., même sans indication spéciale, n'autorise pas à croire que ces noms définis par la législation commerciale sur les marques et la propriété industrielle puissent être laissés au libre usage de chacun.

Pagina

Commentationes

CHANG, T. Y., and W. B. BROWN: A Perturbation Theory of Isoelectronic Molecules: Application to CO Based on N_2 393

MENNA, E., R. MOCCIA, and L. RANDACCIO: Theoretical Calculation of the Vibrational Spectra of Some XH_n Type Molecules 408

KUTZELNIGG, W.: Zur Behandlung der Bindungsalternierung als Störung in der Hückelschen MO-Theorie 417

MALRIEU, J. P.: Etude semiempirique de la configuration moléculaire stable des molécules ionisées ou excitées 434

SMEYERS, Y. G.: About Evaluation of Many-Center Molecular Integrals 452

WU, A. A., and F. O. ELLISON: A Scaled United Atom Model for Diatomic Hydrides . . 460

Springer-Verlag, Berlin • Heidelberg • New York

Druck: Carl Ritter & Co., Wiesbaden

Printed in Germany

Verantwortlich für den Anzeigenteil: Edgar Seidler, 1 Berlin 31 (Wilmersdorf), Heidelberger Platz 3